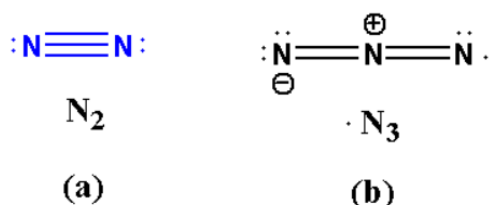
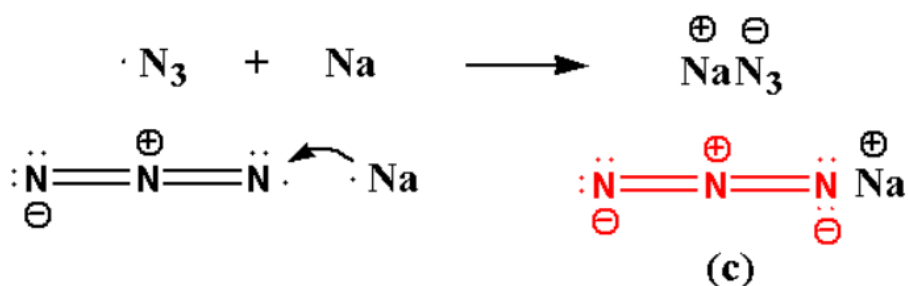


LA MOLÉCULA DEL AÑO 2025. EL HEXANITRÓGENO

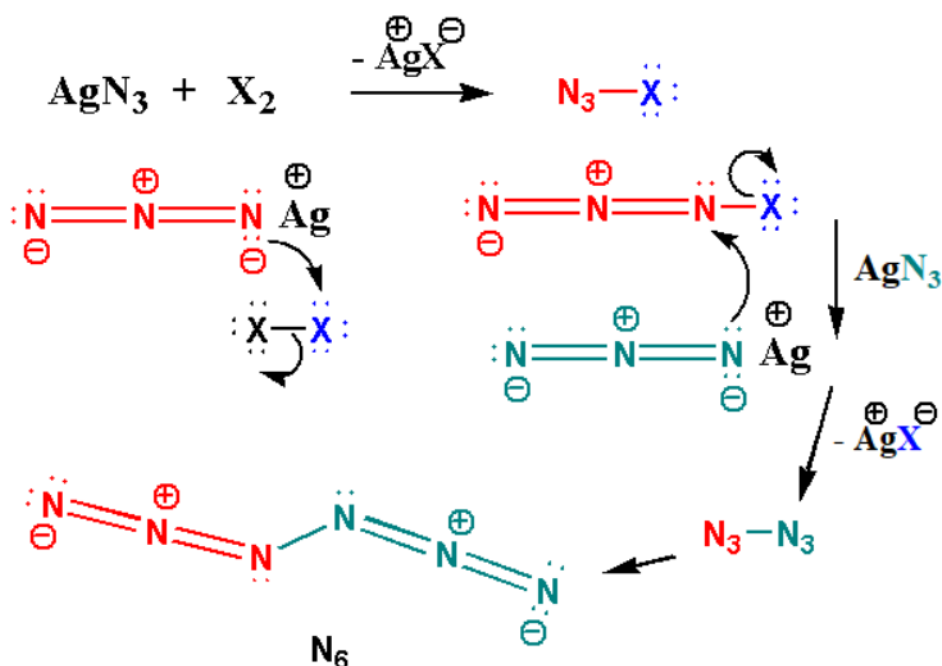
La revista *Chemical and Engineering News* ha publicado un listado de las moléculas con mayor relevancia que se han sintetizado recientemente. El pasado 11 de junio se hizo público en la revista *Nature* la síntesis y caracterización del hexanitrógeno, N_6 , una nueva forma alotrópica de nitrógeno que ha sido destacada como la molécula más votada en el año 2025. Hasta entonces solo eran conocidas las especies dinitrógeno N_2 (1772) y el radical azida $\cdot N_3$ (1956).



En el laboratorio, la azida se aísla normalmente en forma de sal sódica (NaN_3), una especie altamente reactiva y explosiva que se utiliza como material de partida.



Para la síntesis del hexanitrógeno se hace reaccionar, en este caso, un equivalente de la azida de plata con un equivalente halogenado (X_2). El haluro de la azida N_3X formado se hace reaccionar con otro equivalente de la azida de plata resultando finalmente la especie N_6 .



La nueva especie química N_6 se puede estudiar formalmente como la dimerización de dos azidas radicales de fórmula $\cdot N_3$. Sin embargo, este nuevo alótropo es muy inestable y acaba disociándose en tres moléculas de dinitrógeno a la temperatura ambiente.

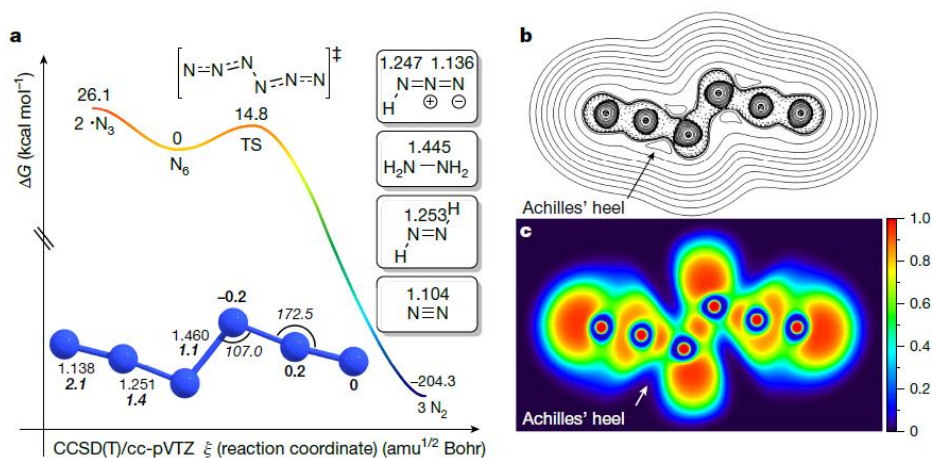


Fig. 4 | Computational analyses for N_6 . **a**, Potential energy profile (ΔG_{298K} , kcal mol⁻¹) for N_6 at CCSD(T)/cc-pVTZ. The optimized parameters of N_6 are given in Ångstrom (normal font), degrees (italics), natural charges in bold and natural bond orders in bold italics. Insets, computed NN bond lengths for

N_2 , *trans*-HNNH, hydrazine and HN_3 at CCSD(T)/cc-pVTZ. **b**, Contour line map of the Laplacian of the electron density of N_6 ; solid and dashed lines represent positive and negative regions, respectively. **c**, ELF map.